УЧЕНЫЕ ЗАПИСКИ КАЗАНСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
Том 151, кн. 1 Физико-математические науки *2009*

УДК 530.145

ДВИЖЕНИЕ КВАНТОВОГО АНГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

С.В. Сазонов

Аннотация

Предложен квантовый аналог классического метода перенормировки в теории ангармонического осциллятора.

Ключевые слова: ангармонический осциллятор, метод перенормировок, когерентное состояние.

Введение

Колебательные движения весьма распространены как в макро-, так и в микромире. В первом случае такие движения описываются классическим вторым законом Ньютона, во втором – уравнениями квантовой механики. Простейшим представителем колебательного движения выступает гармонический осциллятор, собственная частота которого не зависит от амплитуды колебаний. Это свойство называют изохронностью колебаний. Оно является следствием линейности соответствующего уравнения движения. Напротив, уравнения, описывающие движение ангармонического осциллятора, нелинейны. Вследствие этого частота свободных колебаний начинает зависеть от их амплитуды.

В теории классического ангармонического осциллятора разработаны приближенные асимптотические методы, в которых нелинейность рассматривается как возмущение гармонических колебаний [1]. Соответственно, ангармонические эффекты проявляются в виде малых поправок к линейным колебаниям. К наиболее известным подходам такого типа относятся методы Ван-дер-Поля, Линдштедта – Пуанкаре, Крылова – Боголюбова – Митропольского, а также классический метод перенормировки [1]. В этой связи возникает идея поиска соответствующих методов при квантовомеханическом способе описания движения ангармонического осциллятора. Любопытным здесь также представляется обнаружение сходств и отличий в движениях классического и квантового ангармонических осцилляторов. Исследованию этих вопросов и посвящена настоящая работа.

1. Классический ангармонический осциллятор

Для сопоставления движений классического и квантового ангармонических осцилляторов будем в обоих случаях использовать гамильтонов подход. Запишем классические уравнения Гамильтона

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \tag{1}$$

где x – координата осциллятора, p – его импульс, H – функция Гамильтона (энергия), имеющая вид

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega_0^2 x^2}{2} + \frac{\mu\alpha x^3}{3} + \frac{\mu\beta x^4}{4}. \tag{2}$$

Здесь μ – эффективная масса осциллятора, ω_0 – собственная частота в отсутствие ангармонизма, α и β – коэффициенты квадратичной и кубической нелинейностей соответственно.

Подставляя (2) в (1), придем к уравнению

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \alpha x^2 + \beta x^3 = 0. \tag{3}$$

Следуя [1], будем искать решение (3) методом последовательных приближений. Вначале для простоты положим $\alpha = 0$.

В нулевом приближении отбросим в (3) нелинейность. Тогда будем иметь решение, соответствующее гармоническим колебаниям

$$x = a\cos(\omega_0 t + \varphi_0). \tag{4}$$

Здесь a – амплитуда колебаний, φ_0 – начальная фаза.

Первое приближение соответствует подстановке (4) в третье и четвертое слагаемые левой части уравнения (3). Тогда (при $\alpha = 0$)

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = -\frac{3}{4}\beta a^3 \cos(\omega_0 t + \varphi_0) - \frac{\beta}{4} a^3 \cos(3\omega_0 t + 3\varphi_0). \tag{5}$$

Общее решение данного уравнения имеет вид

$$x = a\cos(\omega_0 t + \varphi_0) - \frac{3\beta}{8\omega_0} a^3 t \sin(\omega_0 t + \varphi_0) + \frac{\beta}{32\omega_0^2} a^3 \cos(3\omega_0 t + 3\varphi_0). \tag{6}$$

Здесь обращает на себя внимание второе слагаемое, описывающее неограниченно растущие во времени колебания. Это так называемый секулярный член. Понятно, что при достаточно больших временах ($t > 8\omega_0/3\beta a^2$) секулярный член, описывающий нелинейное возмущение, превзойдет первое (основное) слагаемое в (6), и используемый подход окажется неприменим. В действительности же ничего подобного не наблюдается. Чтобы избавиться от секулярности, выясним вначале причину появления данного члена в (6). Для этого вновь обратимся к (5). Первое слагаемое в правой части можно формально рассматривать как внешнюю силу, периодически меняющуюся со временем на частоте ω_0 собственных линейных колебаний. Это и приводит к неограниченной резонансной раскачке колебаний. Теперь положим, что частота ω нелинейных колебаний отличается от ω_0: $\omega_0 = \omega - \Delta\omega$, где $\Delta\omega \leq \omega$. В этом и состоит идея классического метода перенормировки. Учитывая малость нелинейной поправки к частоте, представим первое (основное) слагаемое в (6) следующим образом

$$a\cos(\omega_0 t + \varphi_0) = a\cos(\omega t + \varphi_0 - \Delta\omega t) \approx a\cos(\omega t + \varphi_0) + a\Delta\omega t \sin(\omega t + \varphi_0).$$

Подставляя данное выражение в (6), придем к условию обнуления секулярного члена: $\Delta\omega = 3\beta a^2/8\omega_0$. Таким образом, частота нелинейных колебаний зависит от их амплитуды:

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{3\beta}{8\omega_0^2} a^2\right).$$

В более общем случае, когда $\alpha \neq 0$, вычисления занимают немного больше времени, но в принципе это не меняет сути идеи. С учетом квадратичной нелинейности имеем

$$\omega = \omega_0 \left[1 + \left(\frac{3\beta}{8\omega_0^2} - \frac{5\alpha^2}{12\omega_0^4}\right) a^2\right]. \tag{7}$$

При этом приближенное решение уравнения (3) не содержит секулярного члена.

2. Квантовый ангармонический осциллятор

Перейдем теперь к квантовому ангармоническому осциллятору. В соответствии с правилами перехода от классической механики к квантовой заменим классический гамильтониан H, а также координату и импульс соответствующими им операторами
$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega_0^2\widehat{x}^2}{2} + \frac{\mu\alpha\widehat{x}^3}{3} + \frac{\mu\beta\widehat{x}^4}{4}. \tag{8}$$

Выразим операторы координаты и импульса через операторы уничтожения $\widehat{a}$ и рождения $\widehat{a}^+$:

$$\widehat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}}\left(\widehat{a} + \widehat{a}^+\right), \quad \widehat{p} = i\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega_0}{2}}\left(\widehat{a}^+ - \widehat{a}\right), \tag{9}$$

где $\hbar$ – постоянная Планка.

Вначале рассмотрим движение гармонического квантового осциллятора. Собственные состояния $|n\rangle$ оператора $\widehat{H}$ в отсутствие ангармонизма ($\alpha = \beta = 0$) подчиняются уравнению
$$\widehat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle, \tag{10}$$
где E_n – возможные значения энергии гармонического осциллятора, определяемые выражением [2]
$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{11}$$
Здесь n – целое число, соответствующее степени возбуждения осциллятора. При этом операторы уничтожения и рождения действуют на стационарные состояния согласно правилам

$$\widehat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \widehat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \widehat{a}^+\widehat{a}|n\rangle = n|n\rangle. \tag{12}$$

Прежде чем начать совершать свободные колебания, квантовый осциллятор должен быть приведен в суперпозиционное (когерентное) состояние внешней классической силой $F(t)$. Известно [3], что действие классической силы переводит гармонический осциллятор в когерентное состояние. Если начальное состояние осциллятора есть $|0\rangle$, то в момент τ окончания действия внешней силы состояние осциллятора примет вид

$$|\theta\rangle = \exp\left[i\left(\theta\widehat{a}^+ + \theta^*\widehat{a}\right)\right]|0\rangle = \exp\left(-|\theta|^2/2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\theta^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle, \tag{13}$$

где

$$\theta = \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega_0}}\int\limits_0^\tau F(t')\exp\left[-i\omega_0(\tau - t')\right]\,dt'$$

Сразу после окончания действия внешней силы, с момента времени τ, начинается свободная эволюция осциллятора, описываемая зависящим от времени вектором состояния:
$$|\theta(t)\rangle = \exp(-i\widehat{H}_0(t-\tau)/\hbar)|\theta\rangle,$$
где $\widehat{H}_0$ определяется выражением (8) при $\alpha = \beta = 0$.

Принимая во внимание (13) и учитывая, что $|n\rangle$ являются собственными состояниями оператора $\widehat{H}_0$ с собственными значениями, определяемыми (11), получим

$$|\theta(t)\rangle = \exp\left(-|\theta|^2/2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\theta^n}{\sqrt{n!}}\exp(-iE_nt/\hbar)|n\rangle =$$
$$= \exp\left[-i\omega_0(t-\tau)/2\right]\exp\left(-|\theta|^2/2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\theta e^{-i\omega_0(t-\tau)}\right)^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle. \quad (14)$$

Таким образом, с точностью до несущественного фазового множителя $\exp\left[-i\omega_0(t-\tau)/2\right]$ можно утверждать, что эволюционирующее во времени когерентное состояние свободного гармонического осциллятора определяется выражением (18) (см. также (19) и (20)) при учете замены

$$\theta \to \theta(t) = \theta\exp\left(-i\omega_0(t-\tau)\right). \quad (15)$$

Так как когерентное состояние является собственным состоянием оператора уничтожения [3], то $\widehat{a}|\theta(t)\rangle = \theta(t)|\theta(t)\rangle$. Тогда легко находится квантовое среднее $\langle\theta(t)|\widehat{x}|\theta(t)\rangle \equiv x$ оператора координаты

$$\widehat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}}\left(\widehat{a}+\widehat{a}^{\,+}\right).$$

Оно имеет вид (4), где амплитуда определяется выражением

$$a = \frac{1}{2\mu\omega_0}\left|\int_0^{\tau}F(t')e^{i\omega_0t'}\,dt'\right|.$$

Таким образом, приходим к совпадению с результатом для классического гармонического осциллятора. Это неслучайно, ибо когерентные состояния являются наиболее близкими к классическим состояниям в том смысле, что они минимизируют соотношение неопределенностей [3]: $\delta x\cdot\delta p = \hbar/2$.

Колебания квантового гармонического осциллятора так же, как и классического, изохронны, что является следствием эквидистантности его энергетического спектра. Действительно, для квантовых переходов между уровнями гармонического осциллятора справедливы правила отбора $\Delta n = \pm 1$ [4]. Тогда для частот разрешенных переходов имеем

$$\omega_+ = \frac{E_{n+1}-E_n}{\hbar} = \omega_- = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} = \omega_0. \quad (16)$$

Определим, с какой вероятностью P_n осциллятор можно обнаружить в одном из собственных энергетических состояний, если он находится в когерентном состоянии. По определению $P_n \equiv |\langle n|\theta\rangle|^2$. Используя (14) и свойство взаимной ортогональности стационарных состояний, найдем

$$P_n \equiv |\langle n|\theta\rangle|^2 = \exp\left(-|\theta|^2\right)\frac{|\theta|^{2n}}{n!}. \quad (17)$$

Это хорошо известное распределение Пуассона [3].

Таким образом, если осциллятор находится в когерентном состоянии, то вероятность его обнаружения в состоянии $|n\rangle$ определяется статистикой Пуассона.

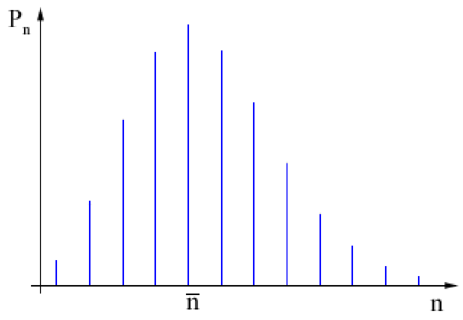

Рис. 1

При этом наиболее вероятным состоянием является состояние с порядковым номером $\bar{n} = |\theta|^2$ (рис. 1).

Данное свойство является ключевым при использовании квантового метода перенормировки.

Как и в случае квантового гармонического осциллятора, начнем с рассмотрения стационарных состояний квантового ангармонического осциллятора. При этом будем опираться на стандартную квантовомеханическую теорию возмущений [4], рассматривая как возмущение ангармоническую поправку к гамильтониану $\widehat{H}_0$. Тогда [4]

$$\widetilde{E}_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{5\alpha^2\hbar^2}{12\mu\omega_0^4}\left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) + \frac{3\beta\hbar^2}{8\mu\omega_0^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right). \tag{18}$$

Теория возмущений справедлива до тех пока, возмущающие добавки значительно меньше основных членов, определяемых гамильтонианом $\widehat{H}_0$. В нашем случае возмущающие добавки с увеличением n растут как n^2. Поэтому, очевидно, выражение (18) справедливо для не очень больших значений n. Однако отбрасывание членов с большими значениями n приведет к нарушению свойства полноты квантовых состояний. Вспоминая о том, что наиболее вероятным значением n в когерентном состоянии является $\bar{n} = |\theta|^2$, запишем $n = \bar{n} + (n - \bar{n})$ и $n^2 = \bar{n}^2 + 2\bar{n}n + (n - \bar{n})^2$. Тогда (18) перепишется в виде

$$\widetilde{E}_n = \widetilde{E}_0 + n\hbar\omega_0\left[1 + \left(\frac{3\beta}{8\omega_0^2} - \frac{5\alpha^2}{12\omega_0^4}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega_0}(2\bar{n} + 1)\right] + (n - \bar{n})^2\left(\frac{3\beta}{8\omega_0^2} - \frac{5\alpha^2}{12\omega_0^4}\right)\frac{\hbar^2}{\mu}. \tag{19}$$

Энергия осциллятора в когерентном состоянии есть

$$\overline{E} = \frac{\hbar\omega_0}{2}(2\bar{n} + 1) = \frac{\hbar\omega_0}{2}\left(2|\theta|^2 + 1\right) \approx \frac{\mu\omega_0^2\langle a^2\rangle}{2},$$

где $\langle a^2\rangle$ – квантовое среднее квадрата амплитуды. Отсюда

$$\frac{\hbar}{\mu\omega_0}(2\bar{n} + 1) = \langle a^2\rangle.$$

Тогда

$$\widetilde{E}_n = \widetilde{E}_0 + \hbar\omega n + \hbar\Omega(n - \bar{n})^2, \tag{20}$$

где $\widetilde{E}_0$ – несущественная нулевая энергия с учетом ангармонических поправок,

$$\Omega = 2\left(\frac{\delta x}{a}\right)^2 \Delta\omega, \tag{21}$$

а величина ω определяется выражением (7) с точностью до замены a^2 на $\langle a^2 \rangle$.

Выражение (21) без последнего слагаемого по своей структуре не отличается от (11). При этом ω есть собственная частота классического ангармонического осциллятора. Последнее слагаемое в (20) можно рассматривать как малую нелинейно-квантовую поправку, так как состояния, далеко отстоящие от $\bar{n}$, согласно распределению Пуассона, маловероятны.

Таким образом, частота осциллятора оказалась перенормированной и так же, как в классическом случае, зависит от квадрата амплитуды колебаний.

Проделанный здесь переход от (18) к (20) составляет суть процедуры квантового метода перенормировки при рассмотрении движения ангармонического осциллятора.

Не вдаваясь в детали дальнейших вычислений, поясним ниже их схему. Используя формулу квантовомеханической теории возмущений [4]

$$|\tilde{n}\rangle = |n\rangle + {\sum_{m=0}^{\infty}}' \frac{\langle m|\widehat{H} - \widehat{H}_0|n\rangle}{E_n - E_m}|m\rangle,$$

найдем основное состояние $|\widetilde{0}\rangle$ ангармонического осциллятора, которое из-за нелинейных добавок отличается от $|0\rangle$. Кроме того, вычислим остальные состояния $|\tilde{n}\rangle$. Воздействие внешней классической силы переводит осциллятор в ангармоническое когерентное состояние

$$|\widetilde{\theta}\rangle = \exp\left[i\left(\theta\widehat{a}^{\,+} + \theta^*\widehat{a}\right)\right]|\widetilde{0}\rangle.$$

Свободная эволюция дается разложением

$$|\widetilde{\theta}(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\tilde{n}|\widetilde{\theta}\rangle \exp\left(-i\frac{\widetilde{E}_n}{\hbar}(t-\tau)\right)|\tilde{n}\rangle. \tag{22}$$

Здесь последнее слагаемое в (20) учитывается только для переходов $\bar{n}+1 \to \bar{n}$ и $\bar{n} \to \bar{n}-1$.

Используем теперь простые рассуждения для выяснения смысла основных результатов. Для частот соседних квантовых переходов имеем

$$\begin{aligned} \omega_+ &= \frac{\widetilde{E}_{n+1} - \widetilde{E}_n}{\hbar} = \omega + \Omega\left[2\left(n-\bar{n}\right)+1\right], \\ \omega_- &= \frac{\widetilde{E}_n - \widetilde{E}_{n-1}}{\hbar} = \omega + \Omega\left[2\left(n-\bar{n}\right)-1\right]. \end{aligned} \tag{23}$$

Наибольший вклад в динамику вносит состояние с $n = \bar{n}$. Поэтому, полагая в (23) $n = \bar{n}$, найдем $\omega_+ = \omega + \Omega$, $\omega_- = \omega - \Omega$. Отличие ω_+ от ω_- является следствием неэквидистантности спектра ангармонического осциллятора.

Из общего курса физики хорошо известно, что сложение двух сонаправленных колебаний с близкими частотами приводит к биениям на половине разности их частот (рис. 2):

$$\frac{\omega_+ - \omega_-}{2} = \Omega = 2\left(\frac{\delta x}{a}\right)^2 \Delta\omega.$$

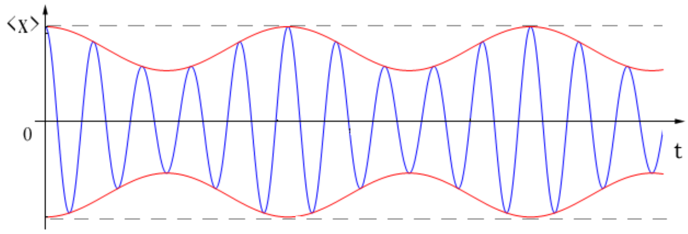

Рис. 2

При этом центральная частота колебаний равна полусумме этих близких частот:

$$\frac{\omega_+ + \omega_-}{2} = \omega.$$

Правилами отбора $\Delta n = \pm 1, \pm 2, \pm 3$ для переходов между уровнями ангармонического осциллятора задается условие существования колебаний на второй и третьей гармониках основной частоты, как это имеет место и в классическом случае.

Таким образом, квантовый метод перенормировки позволяет описать движение ангармонического осциллятора в когерентном состоянии с учетом квантовых поправок. Основной такой поправкой, носящей качественный характер, является предсказание квантовых биений амплитуды на частоте Ω.

Заключение

Квантовый метод перенормировки привел к физически разумным результатам и представил взаимное соответствие между движениями классического и квантового ангармонических осцилляторов. Его можно также рассматривать, например, как квантовую версию асимптотического метода Крылова – Боголюбова – Митропольского. Приложения данного подхода, на наш взгляд, могут быть весьма разнообразными. Это колебания атомов в молекулах, заряженных частиц в бетатроне, осцилляторное эхо, квазирелятивистский заряженный бозон в магнитном поле. При этом возмущающие гамильтонианы не обязательно должны совпадать с рассмотренным здесь. Важно только, чтобы они выступали в роли малых поправок к гармоническим колебаниям. Число степеней свободы может быть больше единицы. В этом случае вычисления окажутся более громоздкими, но принципиальной сути подхода это не меняет.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 09-02-00503а).

Summary

S.V. Sazonov Motion of Quantum Anharmonic Oscillator.

A quantum analogy of the classical renormalization method in the theory of anharmonic oscillator is proposed.

Key words: anharmonic oscillator, renormalization method, coherent state.

Литература

1. *Найфэ А.* Введение в методы возмущений. – М.: Мир, 1984. – 536 с.

2. *Фейнман Р.* Статистическая механика. – М.: Мир, 1978. – 408 с.

3. *Хакен Г.* Квантовополевая теория твердого тела. – М.: Наука, 1980. – 342 с.

4. *Давыдов А.С.* Квантовая механика. – М.: Наука, 1973. – 703 с.

Поступила в редакцию
28.01.09

Сазонов Сергей Владимирович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник РНЦ «Курчатовский институт», г. Москва.

E-mail: *sazonov.sergey@gmail.com*